

Endommagement d'interfaces dans une approche multi-échelle pour composites particulaires fortement chargés subissant de grandes déformations

M. TROMBINI^a, C. NADOT-MARTIN^a, D. HALM^a

a. Département Physique et Mécanique des Matériaux, Institut Pprime – CNRS – ENSMA – Université de Poitiers, UPR 3346, F86961, FUTUROSCOPE CHASSENEUIL CEDEX

Résumé :

Cette contribution présente une technique de transition d'échelle originale, l'« Approche Morphologique » (A.M.), qui permet l'étude du comportement mécanique de composites particulaires fortement chargés tels que les propergols solides. Cette méthode prend en compte la complexité morphologique du matériau ainsi que son comportement fortement non linéaire (grandes déformations de la matrice, endommagement par décohésion d'interfaces). La résolution du problème local couplant ces deux non linéarités se fait par l'intermédiaire d'algorithmes numériques adaptés. L'évolution de l'endommagement est pilotée par l'intermédiaire de critères formulés dans le cadre des transformations finies : des critères de nucléation et de fermeture de défauts sont ainsi proposés et seront activés suivant les différents modes de sollicitation de la microstructure et les caractéristiques des défauts nucléés.

Abstract :

This contribution displays a non-classical scale transition framework, the “Morphological Approach” (M.A.), which allows the study of mechanical behaviour of highly-filled particulate composites as propellant-like materials. This technique takes into account the complex morphology of the material and its strongly non-linear behaviour (finite strain behaviour of the matrix, interfacial damage). The non-linear local problem coupling these two non linearities is numerically solved with specific purpose-built algorithms. The evolution of damage is driven thanks to the formulation of criteria in the finite strains framework: criteria for nucleation and closure of interfacial defects are consequently proposed and will be activated depending on loading path and local morphology.

Mots clés : composites particulaires, modélisation multi-échelle, transformations finies, décohésion d'interfaces, résolution non linéaire

1 Introduction

La méthode de transition d'échelle présentée est une technique spécialement dédiée aux composites particulaires fortement chargés (propergols solides par ex.). Ce type de matériau est constitué d'une matrice élastomère ainsi que de particules réactives en forte proportion volumique (plus de 60%). L'endommagement par décohésion entre les charges et la matrice est un phénomène souvent observé pour de faibles vitesses de sollicitation [1,2]. La bonne connaissance de leur comportement mécanique est nécessaire du fait de leur importante vulnérabilité. En effet, les décohésions pouvant intervenir au niveau des interfaces matrice/charges provoquent l'apparition de volumes de vide propices à l'initiation d'une combustion. Il est donc important de pouvoir prévoir l'endommagement de ces matériaux réactifs sous diverses sollicitations mécaniques afin d'anticiper une réaction accidentelle.

L'Approche Morphologique (A.M.) est une technique de transition d'échelle qui permet *in fine* d'accéder à une estimation des champs mécaniques locaux et à la réponse homogénéisée du matériau. Elle prend en compte la morphologie complexe des composites particulaires fortement chargés en représentant la géométrie de manière directe. Le cadre cinématique proposé amène à une résolution directe du problème de localisation-homogénéisation, malgré les importantes non linéarités caractérisant le comportement local des constituants. Nadot-Martin et al. [3] illustrent ainsi, dans le cadre des transformations finies pour le

matériau sain, le fait qu'il n'est pas nécessaire, avec cette approche, de linéariser au préalable les lois constitutives des différentes phases du matériau, contrairement aux approches fondées sur le principe d'Eshelby [4]. Cela évite les questionnements liés au choix d'une méthode de linéarisation [5].

La modélisation de l'endommagement des interfaces charges/matrice au sein du composite et de son évolution dans le cadre des petites déformations (comportement élastique linéaire isotrope des constituants) [6,7] a permis l'accès aux caractéristiques des défauts, aux champs locaux au voisinage de ces défauts, ainsi qu'aux effets induits par l'endommagement aux deux échelles (locale et globale).

Jusqu'à présent, les non linéarités des matériaux étudiés étaient donc traitées séparément. A présent, l'objectif est de prendre en compte deux des non linéarités déjà traitées auparavant et de les coupler. Ainsi, l'endommagement d'interfaces au sein des composites particuliers fortement chargés sera modélisé tout en considérant que les constituants, notamment la matrice, subissent de grandes déformations. L'enjeu est la résolution du problème fortement non linéaire obtenu, qui sera réalisée de manière numérique.

Dans cet article, nous proposons dans un premier temps une présentation des hypothèses de modélisation du problème qui permettent d'aboutir à l'écriture d'un problème de localisation-homogénéisation impliquant la contrainte nominale au sein des constituants (matrice, particules). Puis, la forme du problème obtenu après introduction des lois de comportement en transformations finies des différentes phases du composite sera décrite. Nous présenterons également quelques éléments de résolution du problème non linéaire obtenu ainsi que les différents critères introduits afin de décrire l'évolution de l'endommagement.

2 Schématisation de la microstructure initiale et approche du problème de localisation-homogénéisation

Les microstructures considérées sont représentées par des grains polyédriques en forte proportion volumique entre lesquels s'intercalent de fines couches de matrice d'épaisseur constante [3,7,8]. Les interfaces des polyèdres en regard sont parallèles. Les couches, notées α , sont caractérisées par plusieurs paramètres morphologiques identifiés dans la configuration initiale non déformée : l'épaisseur de couche h^α , l'aire projetée A^α , le vecteur \mathbf{d}^α reliant les centroïdes des polyèdres se situant de part et d'autre de la couche, et le vecteur unitaire \mathbf{n}^α normal à l'interface de référence grain/couche (FIG. 1). Par l'intermédiaire de ces paramètres morphologiques, la microstructure initiale est donc schématisée de manière explicite, sans nécessiter un maillage des différentes phases du matériau. La précision de la polyédrisation des particules est néanmoins essentielle pour pouvoir se rapprocher au mieux de la microstructure réelle.

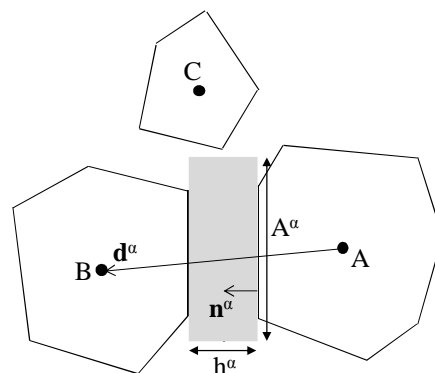


FIG. 1 - Paramètres morphologiques caractéristiques d'une couche α

La matrice étant un élastomère, le problème local est traité dans le cadre des transformations finies. Une description lagrangienne du mouvement est adoptée. Les hypothèses cinématiques introduites lors des études précédentes [3,7] avec l'A.M. sont conservées. Ainsi, tandis que les centroïdes des grains ont un mouvement d'ensemble défini par le gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} (donnée du problème), les grains sont supposés subir un gradient de transformation \mathbf{f}^0 homogène et identique pour tous les grains. Chaque couche α est soumise à un gradient de transformation homogène \mathbf{f}^α qui peut varier d'une couche à l'autre. Enfin, les perturbations localisées dans les zones environnant les coins et arêtes des grains sont négligées (voir [3,7] pour une analyse de la portée de ces hypothèses).

En présence d'endommagement, une nouvelle contrainte est imposée au processus de polyédrisation comme cela avait été fait dans les travaux antérieurs par Nadot et al. [6]. En effet, le cadre cinématique

précédent implique des sauts de déplacement affines des coordonnées spatiales le long des interfaces décollées et par ailleurs seulement deux configurations possibles pour une couche α : soit ses deux interfaces sont décollées et il y a décohéssion de la couche, soit aucune des deux interfaces n'est décollée et la couche reste saine. Soulignons que la décohéssion d'une interface donnée ne peut pas être partielle mais que cela n'exclut pas pour autant la décohéssion partielle d'une particule représentée par un polyèdre comportant plusieurs facettes. Toutefois, cette double décohéssion ne peut être acceptable que si, géométriquement, les interfaces parallèles en regard ont des propriétés géométriques proches. Cette nouvelle exigence est donc imposée à la polyédrisation des charges.

Selon une méthodologie analogue à celle de [6], fondée sur l'exploitation des conditions de sauts de déplacement aux interfaces, on montre que le gradient de transformation d'une couche α s'exprime en fonction du gradient de la transformation global \mathbf{F} , du gradient de la transformation des grains \mathbf{f}^0 , ainsi que des données morphologiques :

$$\mathbf{f}_{ij}^\alpha = \mathbf{f}_{ij}^0 + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0)_{ik} \frac{d_k^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} + \mathbf{f}_{ij}^{\alpha D} \quad (1)$$

Le terme $\mathbf{f}^{\alpha D}$ représente la contribution spécifique des deux défauts potentiellement présents aux interfaces de la couche considérée.

Le principe de macro-homogénéité de Hill-Mandel sous une forme généralisée prenant en compte les discontinuités aux interfaces de couches permet ensuite d'obtenir une équation en contrainte nominale à résoudre de la forme :

$$(1-c)\mathbf{s}_{ij}^{*0} + \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha \mathbf{s}_{ij}^{*\alpha} A^\alpha h^\alpha - \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha \mathbf{t}_i^\alpha d_j^\alpha = 0 \quad (2)$$

où $c = \frac{1}{|V_0|} \sum_\alpha A^\alpha h^\alpha$ est la concentration volumique de couches dans la configuration de référence et

$\mathbf{t}_i^\alpha = \mathbf{s}_{ki}^{*\alpha} n_k^\alpha A^\alpha$ est la force totale transmise à travers la couche α à l'instant t exprimée dans la configuration de référence. \mathbf{s}^{*0} est le tenseur des contraintes nominales moyen sur le volume total des grains et $\mathbf{s}^{*\alpha}$ est le tenseur des contraintes nominales moyen sur le volume d'une couche α .

3 Résolution en hyperélasticité et prise en compte de l'évolution de l'endommagement

3.1 Introduction des lois locales

Pour une approche progressive des difficultés, nous considérons que les constituants du composite particulière étudié ont un comportement hyperélastique décrit à l'aide d'un potentiel de Néo-Hooke, avec toutefois un découplage distorsion-volume (formulation en invariants modifiés du tenseur des dilatations de Cauchy-Green à droite). Un contraste important entre les charges et la matrice est pris en compte, les charges constituant une phase quasi-rigide du matériau dans le domaine des faibles vitesses de sollicitation considéré ici. L'hypothèse de coefficient de frottement infini pour les défauts fermés introduite dans les travaux antérieurs [6,7] est maintenue.

L'introduction des lois de comportement locales dans l'équation (2) mène avec (1) à une équation (3) se décomposant en trois termes : un terme Φ^α se rapportant à toute la microstructure (quelle que soit la couche α), un terme Φ^β relatif aux couches ayant des défauts ouverts à leurs interfaces (couches β) et un terme Φ^f relatif aux couches avec des défauts fermés à leurs interfaces (couches f).

Chacun de ces termes présente une dépendance en plusieurs paramètres, de manière très fortement non linéaire. Pour chacun de ces paramètres, l'exposant « 0 » fait référence aux charges, l'exposant « α » aux couches de la microstructure, l'exposant « β » aux couches comportant des défauts ouverts et enfin l'exposant « f » aux couches comportant des défauts fermés. C_{10}^0 et C_{10}^α sont les paramètres matériau du potentiel de Néo-Hooke pour les charges et la matrice, K^0 et K^α sont les modules de compressibilité associés à chacune de ces deux phases. $|V_0|$ est le volume initial total de la microstructure et nc^x est un paramètre

donnant le nombre de couches correspondant à l'exposant x qui lui est associé (α , β ou f). Nous remarquons également dans chacun des trois termes identifiés dans (3) la présence des données morphologiques de la microstructure : h^x , A^x , le vecteur \mathbf{d}^x et le vecteur unitaire \mathbf{n}^x . De plus, les trois termes dépendent du gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} , la donnée du problème. Nous repérons enfin les inconnues de l'équation (3) : le gradient de la transformation des grains \mathbf{f}^0 ainsi que l'ensemble des termes $\{\mathbf{f}^{aD}\}$ liés à l'effet des défauts au sein de la microstructure. Lorsque la couche est saine, $\mathbf{f}^{aD} = 0$. Lorsque la couche présente des défauts ouverts à ses interfaces, $\mathbf{f}^{aD} = \mathbf{f}^{\beta D}$. Lorsque la couche présente des défauts fermés à ses interfaces, $\mathbf{f}^{aD} = \mathbf{f}^{fD}$.

$$\begin{aligned} & \Phi_{ij}^{\alpha} [C_{10}^0, C_{10}^{\alpha}, K^0, K^{\alpha}, |V_0|, nc^{\alpha}, h^{\alpha}, A^{\alpha}, \mathbf{d}^{\alpha}, \mathbf{n}^{\alpha}, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \mathbf{f}^{aD}] \\ & + \Phi_{ij}^{\beta} [C_{10}^{\alpha}, K^{\alpha}, |V_0|, nc^{\beta}, h^{\beta}, A^{\beta}, \mathbf{d}^{\beta}, \mathbf{n}^{\beta}, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \mathbf{f}^{\beta D}] \\ & + \Phi_{ij}^f [C_{10}^{\alpha}, K^{\alpha}, |V_0|, nc^f, h^f, A^f, \mathbf{d}^f, \mathbf{n}^f, \mathbf{F}, \mathbf{f}^0, \mathbf{f}^{fD}] = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Les inconnues sont donc multiples : elles dénombrent à la fois le gradient de la transformation des grains \mathbf{f}^0 , les termes $\{\mathbf{f}^{\beta D}\}$ liés aux nc^{β} couches comportant des défauts ouverts, et les termes $\{\mathbf{f}^{fD}\}$ liés aux nc^f couches comportant des défauts fermés. Le nombre d'inconnues est donc de $\{1 + nc^{\beta} + nc^f\}$. Il est ainsi nécessaire de disposer d'équations supplémentaires à l'équation (3) pour pouvoir résoudre le problème de localisation-homogénéisation. Notons que l'obtention des inconnues précitées permettra ensuite d'obtenir le gradient de transformation hétérogène dans la matrice via (1), le champs de contraintes nominales et enfin, la contrainte nominale homogénéisée par moyenne volumique.

3.2 Éléments de résolution

L'hypothèse d'un coefficient de friction infini aux lèvres des défauts fermés interdit le glissement et implique le blocage de ces défauts fermés au sein du volume considéré. Le terme \mathbf{f}^{fD} pour chaque couche comportant des défauts fermés ne peut donc pas dépendre du gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} . De plus, en cohérence avec cette hypothèse, la nucléation des défauts est supposée en mode I. Les défauts sont donc nécessairement ouverts avant d'être fermés. Ainsi, le terme \mathbf{f}^{fD} est calculé à la fermeture des défauts :

$$\mathbf{f}^{fD} = \mathbf{f}_{\text{fermeture}}^{\beta D} \quad (4)$$

Au contraire, $\mathbf{f}^{\beta D}$ a toutes les raisons de dépendre du chargement et donc du gradient de la transformation macroscopique \mathbf{F} . Dans la continuité de ce qui a été fait dans les travaux antérieurs [7], cette dépendance est supposée être de même forme pour toutes les couches β et est recherchée de sorte que :

$$\mathbf{S}^* = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} \quad (5)$$

où $W = \langle w \rangle_{|V_0|}$ est l'énergie libre macroscopique et $\mathbf{S}^* = \langle \mathbf{s}^* \rangle_{|V_0|}$ est la contrainte nominale macroscopique.

Enfin, la représentation morphologique et cinématique au départ de l'A.M. entraîne que les vecteurs moyens de discontinuité de déplacement au niveau des interfaces sont de signes opposés (voir Dartois et al. [7] pour plus de détails). Ceci permet d'obtenir une relation pour chaque couche présentant des défauts ouverts, afin d'aider à la résolution.

L'équation (3) et les éléments (4)-(5) ci-dessus pourront donc, après résolution, nous fournir l'accès aux inconnues \mathbf{f}^0 , $\{\mathbf{f}^{\beta D}\}$ et $\{\mathbf{f}^{fD}\}$. Nous supposons chacune de ces inconnues linéaires sur les incréments de calcul, choisis suffisamment petits. La procédure de résolution numérique se base alors sur la méthode de Newton-Raphson.

3.3 Critères de nucléation et de fermeture de défauts

La résolution du problème tel que présenté jusqu'à présent permet de déterminer le comportement du matériau endommagé à configuration d'endommagement fixée. Afin de prendre en compte l'évolution de la configuration des défauts, cette formulation doit être enrichie de critères de nucléation et de fermeture.

Comme évoqué précédemment, la décohérence est supposée se produire seulement en mode I. Le critère de nucléation proposé par Dartois et al. [7] est ici étendu en transformations finies. Dans le cadre des petites

perturbations, la normale à l'interface de référence d'une couche était supposée invariante. En transformations finies, il n'est plus possible de faire cette approximation. Il est nécessaire de considérer la normale actuelle à l'interface.

Considérons une couche α avant décohésion (FIG. 2). Deux points P_1 et P_2 sont définis de part et d'autre de l'interface de référence $I^{1\alpha}$ de cette couche, respectivement dans le grain et dans la matrice. Ces deux points sont chacun à une distance λ de leur projection normale B_1 sur l'interface, B_1 étant le centre de gravité de $I^{1\alpha}$. La différence de déplacement $\Delta \mathbf{U}$ entre P_1 et P_2 s'exprime alors :

$$\Delta \mathbf{U} = \left[2(\mathbf{f}^0 - \mathbf{Id}) + (\mathbf{F} - \mathbf{f}^0) \frac{\mathbf{d}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha}{h^\alpha} \right] \lambda \mathbf{n}^\alpha \quad (6)$$

où \mathbf{Id} est le tenseur identité d'ordre 2.

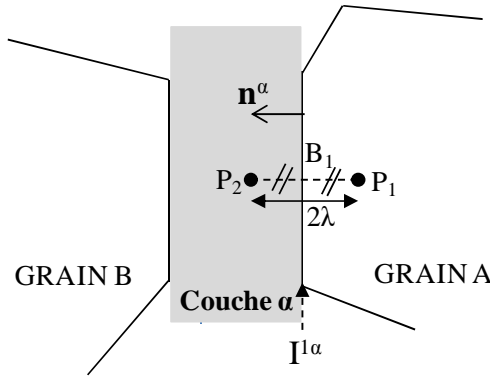


FIG. 2 – Schématisation et paramètres utilisés pour définir la nucléation de défauts (configuration de référence)

Une nucléation pourra avoir lieu lorsque la différence des positions actuelles de P_1 et P_2 projetée sur la normale actuelle \mathbf{n}'^α à l'interface atteindra une valeur critique. Nous nous attachons ainsi à l'évolution de la grandeur :

$$d_{\text{norm}}^\alpha = (2\lambda \mathbf{n}^\alpha + \Delta \mathbf{U}) \cdot \mathbf{n}'^\alpha \quad (7)$$

La normale à l'instant actuel est calculée à partir d'un petit élément de surface de l'interface initiale $I^{1\alpha}$, de normale \mathbf{n}^α . Le transporté de cet élément de surface, à l'instant t , est calculé ; sa normale actuelle est \mathbf{n}'^α . Nous obtenons alors :

$$\mathbf{n}'^\alpha = \frac{\mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{1\alpha} \wedge \mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{2\alpha}}{\|\mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{1\alpha}\| \times \|\mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{2\alpha}\| \times |\sin(\mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{1\alpha}, \mathbf{f}^0 \mathbf{V}^{2\alpha})|} \quad (8)$$

où $\mathbf{V}^{1\alpha}$ et $\mathbf{V}^{2\alpha}$ sont deux vecteurs unitaires de deux directions définies comme reliant le barycentre B_1 et deux sommets de la facette $I^{1\alpha}$ dans sa configuration initiale et de manière à former une base orthonormée avec la normale initiale \mathbf{n}^α (FIG. 3).

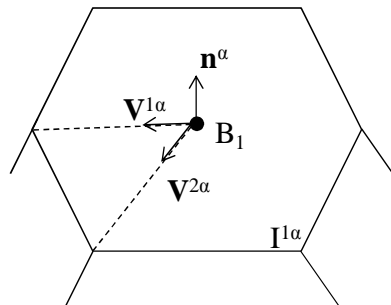


FIG. 3 – Définition des vecteurs unitaires nécessaires au calcul de la normale actuelle

Le critère de fermeture des défauts s'exprime à partir du saut de déplacement local au niveau de l'interface de référence $\langle \mathbf{b}^\beta \rangle_{\Pi\beta}$. Les défauts se sont refermés lorsque :

$$\langle \mathbf{b}^\beta \rangle_{\Gamma^\beta} \cdot \mathbf{n}^\beta = 0 \quad (9)$$

Tant que cette expression reste positive, les défauts restent ouverts.

4 Perspectives

Dans un premier temps, le problème de localisation-homogénéisation sera résolu numériquement et les résultats validés dans le cas du matériau sain par comparaison avec les résultats issus des travaux de Nadot-Martin et al. [3]. La contribution des défauts sera donc ignorée dans les équations (3) à (5). Ensuite, il sera enrichi avec les termes traduisant l'influence des défauts ouverts et fermés au sein de la microstructure, et l'algorithme de résolution de Newton-Raphson sera complété afin d'accéder aux différentes inconnues. Les critères de nucléation et de fermeture de défauts pourront être insérés à la procédure de résolution. Nous mettrons enfin en place l'extraction des données locales et macroscopiques nécessaires à l'analyse des phénomènes pouvant se produire au sein du matériau sous différents types de chargements afin de pouvoir réaliser la validation du modèle.

Remerciements

Nous remercions la Direction Générale pour l'Armement (DGA) et la Région Poitou-Charentes pour leur soutien financier par l'intermédiaire de la bourse de thèse de Marion Trombini.

Références

- [1] Funfschilling C., Comportement et endommagement de composites viscoélastiques. Application aux composites énergétiques, Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris, 2007.
- [2] Xu F., Aravas N., Sofronis P., Constitutive modeling of solid propellant materials with evolving microstructural damage, *J. Mech. Phys. Solids*, 56, 2050-2073, 2008.
- [3] Nadot-Martin C., Touboul M., Dragon A., Fanget A., Direct scale transition approach for highly-filled viscohyperelastic particulate composites: computational study, *Multiscale Modeling of Heterogeneous Materials: from microstructure to macro-scale properties*, Chapitre 12, O. Cazacu ed., ISTE/Wiley, 218-237, 2008.
- [4] Ponte-Castañeda P., The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites, *J. Mech. Phys. Solids*, 39, 45-71, 1991.
- [5] Rekik A., Auslender F., Bornert M., Zaoui A., Objective evaluation of linearization procedures in nonlinear homogenization: a methodology and some implications on the accuracy of micromechanical schemes, *Int. J. Solids. Struct.*, 44, 3468-3496, 2007.
- [6] Nadot C., Dragon A., Trumel H., Fanget A., Damage modelling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach, *J. Theor. and Appl. Mech.*, 44, 553-583, 2006.
- [7] Dartois S., Nadot-Martin C., Halm D., Dragon A., Fanget A., Contesse G., Micromechanical modelling of damage evolution in highly-filled particulate composites. Induces effects at different scales, *Int. J. of Damage Mech.*, sous presse, DOI: 10.1177/1056789512468916, 2013.
- [8] Christoffersen J., Bonded granulates, *J. of the Mechanics and Physics of Solids*, 31, no. 1, 55-83, 1983.